

李涵榮 助理教授

LI, HAN-JUNG



#### 聯絡方式：

辦公室：理學 208 室  
分機：3308  
研究室：化學 204 室  
分機：3309  
傳真：03-2653399  
E-mail: hqli@cycu.edu.tw

#### 學歷：

國立臺灣師範大學化學系  
博士（2006-2011）

#### 經歷：

國立陽明交通大學 應用化學系  
博士後研究員（2023-2026）  
工業技術研究院 材料與化工研究所 研究員（2016-2023）  
美國史丹佛大學 化學工程系  
博士後研究員（2013-2015）  
國立臺灣師範大學 化學系 博士  
後研究員（2011-2013）

#### 授課科目：

化學數學、普通化學

# 材料計算化學研究室

## 研究興趣

本實驗室專注於計算化學模擬，以電腦輔助技術，進行能源材料與功能性有機分子的開發與優化。我們藉由量子力學模擬，由微觀電子結構與分子軌域出發，深度解析化學反應路徑、過渡態及動力學性質。整合電腦輔助材料設計，以計算結果引導實驗設計策略，建立高效的材料設計流程，縮短研發週期。

## 研究方向

1. **能源材料異相催化模擬**: 運用量子力學模擬技術進行能源相關材料異相催化模擬，預測催化活性、選擇性及反應動力學分析。
2. **化學反應機制模擬**: 化學反應路徑與動力學機制模擬，解析反應過渡態、活化能及分子軌域作用。
3. **電腦輔助材料設計**: 運用電腦輔助技術，設計高效能源材料與功能性有機分子，透過電腦模擬加速材料開發縮短研發週期

## 代表著作

1. Lian-Ming Lyu,<sup>#</sup> Yu-Chung Chang,<sup>#</sup> Han-Jung Li,<sup>#</sup> (equally contribution) Pei-En Wang, Ruei-Hung Juang, Ming-Yen Lu, Cheng-Shiuan Li, Chun-Hong Kuo\* Turning the Surface Electronic Effect over Core-Shell CoS<sub>2</sub>-Fe<sub>x</sub>Co<sub>1-x</sub>S<sub>2</sub> Nanoctahedra towards Electrochemical Water Splitting in the Alkaline Medium *Advanced Science* **2025**, 12, 2411622.
2. Lian-Ming Lyu,<sup>#</sup> Han-Jung Li,<sup>#</sup> (equally contribution) Ren-Shiang Tsai, Ching-Feng Chen, Yu-Chun Chuang, Cheng-Shiuan Li, Jeng-Lung Chen, Te-Wei Chiu,\* and Chun-Hong Kuo\* In Operando X-ray Spectroscopic and DFT Studies Revealing Improved H<sub>2</sub> Evolution by the Synergistic Ni–Co Electron Effect in the Alkaline Condition *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, 16, 27329-27338.
3. Han-Jung Li, Adam C. Lausche, Andrew A Peterson, Heine A Hansen, Felix Studt, Thomas Bligaard\* “Using Microkinetic Analysis to Search for Novel Anhydrous Formaldehyde Production Catalysts” *Surf. Sci.* **2015**, 641, 105-111.
4. Han-Jung Li and Jia-Jen Ho\* “Theoretical Calculations on the Oxidation of CO on Au<sub>55</sub>, Ag<sub>13</sub>Au<sub>42</sub>, Au<sub>13</sub>Ag<sub>42</sub>, and Ag<sub>55</sub> Clusters of Nanometer Size” *J. Phys. Chem. C*, **2012**, 116, 13196-13201.